



TITLE:

2次非線形方程式系の解法に基づく 行列の対角化法 (計算科学の基盤技 術としての高速アルゴリズムとそ の周辺)

AUTHOR(S):

近藤, 弘一; 杉本, 昌平; 岩崎, 雅史

CITATION:

近藤, 弘一 ...[et al]. 2次非線形方程式系の解法に基づく行列の対角化法 (計算科学の基盤技術としての高速アルゴリズムとその周辺). 数理解析研究所講究録 2008, 1614: 156-165

ISSUE DATE:

2008-10

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/140105>

RIGHT:

2 次非線形方程式系の解法に基づく行列の対角化法

同志社大学工学部 近藤 弘一 (Koichi Kondo)

Faculty of Engineering, Doshisha University

同志社大学大学院工学研究科 杉本 昌平 (Shohei Sugimoto)

Graduate School of Engineering, Doshisha University

京都府立大学人間環境学部 岩崎 雅史 (Masashi Iwasaki)

Faculty of Human Environment, Kyoto Prefectural University

1 目的

本論では 2 次非線形方程式系の解法に基づく固有値分解アルゴリズムの提案を行う。固有ベクトルが平面上にあるとすると固有値問題は 2 次非線形連立方程式系となる。これをニュートン法により解くことで 1 組の固有対が求まる。すべての組を求めるためにはニュートン法の初期値をうまく選ぶ方法が考えられるが、ニュートン法の大域的収束性は極めて難しい問題である。本論では発想を逆転させて既に得られた固有ベクトルには収束しない方法を考える。平面条件は任意に設定可能であることに着目する。平面の法線ベクトルを既得の固有ベクトルで張られる部分空間の直交補空間から選ぶ。これにより平面上には既得のベクトルは存在しないため、ニュートン法で同じベクトルに収束することはない。この事実より逐次的にすべての固有対を求めることが可能となる。本論ではまた、提案アルゴリズムの数値実験結果を示す。

2 Elgindi の 2 次固有値分解法

本節では Elgindi らによる 2 次固有値分解法 [2] を紹介する。固有値問題 $Ax = \lambda x$ を考える。一般性を失うことなく固有ベクトル x の k 番目の要素を $x_k = 1$ とおく。このとき、固有値は $\lambda = A(k, :)x$ と与えられる。固有値問題に代入すると 2 次非線形方程式系

$$F = Ax - xA(k, :)x = 0 \quad (1)$$

が得られる。(1) は未知変数が $n - 1$ 個、方程式が $n - 1$ 本の連立方程式である。この系を何らかの数値アルゴリズムで解けば、1 組の固有対が求まる。いま、非線形方程式系の数値解法として最も有名なニュートン法

$$x^{(l+1)} = x^{(l)} - J(x^{(l)})^{-1} F(x^{(l)}), \quad l = 0, 1, 2, \dots, l_{\max} \quad (2)$$

を用いる。ただし、 J は F のヤコビ行列である。ニュートン法は一般に単根であれば局所 2 次収束であることが知られている。(2) により 1 組の固有対 λ, x が得られる。すべ

ての固有ベクトル $X = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)$ を求めるために連続変化法を考える。いま、行列 A を

$$A(t) = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad t = hk \quad (3)$$

と t について変化させる。 $A(0)$ の固有ベクトルは明らかに $X(0) = I_n$ である。次に、 $A(h)$ に対して初期値を $X(0)$ としてニュートン法 (2) により固有ベクトル $X(h)$ を求める。同様に、 $A(kh)$ に対して初期値を $X((k-1)h)$ としてニュートン法により固有ベクトル $X(kh)$ を求める。これを繰り返すと最後に $A(1) = A$ の固有ベクトル $X(1) = X$ が得られる。 A の固有ベクトル X が正しく求まるためには、行列の刻み幅 h の決定が重要となる。Elgindi らは刻み幅を A のゲルシュゴリン半径より

$$h = 2^{-s}, \quad s = \text{floor} \left(\frac{\ln(r/d)}{\ln 2} + 2 \right), \quad r = \max_i \left(\sum_{j=1, i \neq j}^n |a_{ij}| \right), \quad d = \min_{i \neq j} |a_{ii} - a_{jj}| \quad (4)$$

と定めた。さらには初期値を補外

$$X^{(0)}(t) = 3X(t-h) - 3X(t-2h) + 3X(t-3h) \quad (5)$$

にとることで収束する確率を高めた。この手法は各固有ベクトルを並列に計算可能であることに注意する。問題点としては、まず、 $h = 0$ の場合は連続変化ができないことがあげられる。次に、 $x_k \approx 0$ となるときは精度悪化する問題がある。さらには、 $A(t)$ ($t < 1$) に関する固有値分解は最終的には破棄されるので、計算時間の上で問題がある。

3 ニュートン法とレイリー商反復

3.1 2 次非線形方程式系による固有対の解法

本節では Elgindi らの議論を一般化した 2 次非線形方程式系による固有対の解法を考える。行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を考える。いま A には条件を一切課さない。固有ベクトル x は平面 $(z, x) = z^H x = C$ 上にあるとする。ただし、 C は定数とする。 $z = e_k, C = 1$ のときが Elgindi らの場合である。このとき固有値は

$$\lambda = \mathcal{R}_A(z, x) = \frac{(z, Ax)}{C} = \frac{(A^H z, x)}{C} = \frac{(w, x)}{C}, \quad w = A^H z \quad (6)$$

で与えられる。 $\mathcal{R}_A(z, x)$ はある一般化されたレイリー商 [1, p.28]

$$\mathcal{R}_A(z, x) = \frac{(z, Ax)}{(z, x)} \quad (7)$$

である。(6)を固有値問題に代入すると2次非線形方程式系

$$F = Ax - x(w, x)/C = 0 \quad (8)$$

を得る。条件 $(z, x) = C$ の下で (8) にニュートン法を適用すると

$$x^{(l+1)} = \frac{Cy^{(l)}}{(z, y^{(l)})}, \quad y^{(l)} = x^{(l)} - J(x^{(l)})^{-1}F(x^{(l)}), \quad l = 0, 1, \dots, l_{\max}, \quad (9)$$

$$J = J(x) = A - \lambda(x)I - xw^H/C, \quad \lambda(x) = (w, x)/C \quad (10)$$

が求まる。

3.2 レイリー商反復

さらに (9)–(10) を Sherman-Morrison の公式

$$(M + uv^H)^{-1} = \left(I - \frac{M^{-1}uv^H}{1 + (v, M^{-1}u)} \right) M^{-1} \quad (11)$$

を用いて変形すると,

$$x^{(l+1)} = \frac{Cy^{(l)}}{(z, y^{(l)})}, \quad y^{(l)} = \frac{\lambda^{(l)}}{(w, \hat{x}^{(l)})/C - 1} \hat{x}^{(l)}, \quad \hat{x}^{(l)} = (A - \lambda^{(l)}I)^{-1}x^{(l)}, \quad \lambda^{(l)} = (w, x^{(l)})/C \quad (12)$$

が求まる。残差 F の計算における精度悪化を防ぐためにニュートン反復の各ステップで $x^{(l)}$ の規格化を行う。このとき、 $x^{(l)}$ が平面上にあるためには平面の方程式 $(z, x) = C$ の定数項を

$$C = C^{(l)} = (z, x^{(l)}) \quad (13)$$

と各ステップで変更し、平面を平行移動させる。すると $x^{(l)}$ は平面 $(z, x^{(l)}) = C^{(l)}$ と球面 $\|x^{(l)}\| = 1$ 上にあり、ニュートン法 (12) は

$$x^{(l+1)} = \frac{\hat{x}^{(l)}}{\|\hat{x}^{(l)}\|}, \quad \hat{x}^{(l)} = (A - \lambda^{(l)}I)^{-1}x^{(l)}, \quad \lambda^{(l)} = (w, x^{(l)})/C^{(l)}, \quad C^{(l)} = (z, x^{(l)}) \quad (14)$$

と表される。(14)は文献 [1, p.194] では右レイリー商反復と呼び、局所2次収束することが示されている。本論では (14) を平面型レイリー商反復と呼ぶことにする。また、 $x^{(l)}$ が球面 $\|x^{(l)}\| = 1$ 上にあり、かつ各ステップで $z = x^{(l)}$ と変更されるとすると、(14)は

$$x^{(l+1)} = \frac{\hat{x}^{(l)}}{\|\hat{x}^{(l)}\|}, \quad \hat{x}^{(l)} = (A - \lambda^{(l)}I)^{-1}x^{(l)}, \quad \lambda^{(l)} = (x^{(l)}, Ax^{(l)}) \quad (15)$$

と表される。(15)を通常はレイリー商反復と呼ぶ。本論では (15) を球面型レイリー商反復と呼ぶことにする。また、(15)は3次非線形方程式 $F = Ax - x(x, Ax) = 0$ にニュートン法を適用したものと等価であることに注意する。さらには古くは Ostrowski により局

所 2 次収束することが示されている。本論では平面型レイリー商反復を中心に議論する。計算手順を Algorithm 1 に示す。

Algorithm 1. Rayleigh quotient iteration of plane type.

$[\lambda, \mathbf{x}, E] = \text{function PRQI}(A, \mathbf{z})$

$l_{\max} = 50; \epsilon_{\text{itr}} = 10^{-14}$

$\mathbf{w} := A^H \mathbf{z}; \mathbf{x} := \mathbf{z}; C := (\mathbf{z}, \mathbf{x}); \lambda := (\mathbf{w}, \mathbf{x})/C; \mathbf{F} := A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x}; E := \|\mathbf{F}\|_{\infty}$

$l := 0$

do while $l \leq l_{\max}$ and $E \geq \epsilon_{\text{itr}}$

if $\text{rank}(A - \lambda I) < n$ then break

$\mathbf{y} := (A - \lambda I)^{-1} \mathbf{x}; \mathbf{x} := \mathbf{y}/\|\mathbf{y}\|$

$C := (\mathbf{z}, \mathbf{x}); \lambda := (\mathbf{w}, \mathbf{x})/C; \mathbf{F} := A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x}; E := \|\mathbf{F}\|_{\infty}$

$l := l + 1$

end

4 2 次非線形方程式系に基づく固有値分解

4.1 ニュートン法の収束領域

ニュートン法は局所的には 2 次収束することが理論的に明解であるが、大域的な収束性については難しい課題である。一般に、初期値と収束値との関係を図示するとフラクタル状になることが知られている [3, 4]。レイリー商反復もニュートン法と等価であるから同様の議論が成り立つ。これを具体例で確認する。固有値が $\lambda = 1, 2, 3$ の対称行列

$$A = \begin{pmatrix} 1.8747 & 0.3034 & -0.1772 \\ 0.3034 & 1.2684 & 0.4836 \\ -0.1772 & 0.4836 & 2.8570 \end{pmatrix} \quad (16)$$

を考える。初期値を平面 $(\mathbf{z}, \mathbf{x}) = C$ 上で $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{z} + x\mathbf{p}_1 + y\mathbf{p}_2$, $-10 \leq x \leq 10$, $-10 \leq y \leq 10$ と様々に変化させる。ただし、 $\{\mathbf{z}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\}$ は適当な正規直交基底とする。初期値それぞれに対してレイリー商反復の平面型 (14), 球面型 (15) を用いて固有対 λ, \mathbf{x} を求め、 $\lambda = 1$ に収束するとき白色、 $\lambda = 2$ に収束するとき明灰色、 $\lambda = 3$ に収束するとき暗灰色をプロットする。 $\mathbf{z} = \mathbf{e}_3$ としたときの結果を図 1(a), (b) に示す。また、同様に固有値が $\lambda = 1, 2, 3$ の非対称行列

$$A = \begin{pmatrix} 2.8021 & -1.6492 & 0.4185 \\ 0.9953 & -1.4193 & 1.2532 \\ 0.8717 & -5.8379 & 4.6172 \end{pmatrix} \quad (17)$$

も考える。初期値を $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{z} + x\mathbf{p}_1 + y\mathbf{p}_2$, $-5 \leq x \leq 5$, $-5 \leq y \leq 5$ として、同様にプロットした結果を図 1(c), (d) に示す。(b)を除いて(a), (c), (d)では領域の境界では複数の色が混ざり合いフラクタル状になることが分かる。この境界付近に初期値をとるとき、少し初

期値をずらしただけで異なる解に収束する。初期値を適切に推定しすべての固有対を求めることは事実上不可能である。そこで別の議論を考える。例えば固有値 λ_3 の固有ベクトル \mathbf{x}_3 を既知とする。このとき平面の法線ベクトル \mathbf{z} を $\mathbf{z} \perp \mathbf{x}_3$ をみたすように選ぶ。このとき収束領域は図 1(e) となる。暗灰色の領域は存在せず λ_3 に収束は一切していない。平面 $(\mathbf{z}, \mathbf{x}) = C$ と直線 \mathbf{x}_3 とは交点をもたないので、平面上に \mathbf{x}_3 は存在しない。そのため、ニュートン法が \mathbf{x}_3 に収束することはない。同様に、 λ_2 の固有ベクトル \mathbf{x}_2 を既知とする。法線ベクトルを $\mathbf{z} \perp \mathbf{x}_2$ と選んで図示すると図 1(f) となる。明灰色の領域は存在せず、 λ_2 には一切収束していない。さらには、 λ_2, λ_3 を既知とする。このとき $\mathbf{z} \perp \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 \rangle_{\mathbb{R}}$ と選ぶ。結果は図 1(g) となる。明灰色、暗灰色の領域は存在せず、 λ_2, λ_3 には収束せず、すべての初期値で λ_1 に収束する。

4.2 逐次解法

この事実をもとにすべての固有対を求めるアルゴリズムを構成すると、次の Algorithm 2 となる。

Algorithm 2. Successive Rayleigh quotient iteration of plane type.

```
[X, D] = function SPRQI(A)
Randomly choose z.
for k = 1, 2, ..., n
    [xk, λk, Ek] = PRQI(A, z)
    Randomly choose z ∈ Wk⊥, Wk = ⟨x1, ..., xk⟩C.
end
X = (x1 ... xn); D = diag(λ1, ..., λn)
```

Algorithm 2 では直交補空間 W_k^\perp から \mathbf{z} を選ぶ必要がある。これは具体的には $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ から正規直交基底 $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k\}$ を生成し、ランダムに選んだ \mathbf{z} から $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k$ の成分を除けばよい。直交化には修正グラムシュミット法を用いる。この際に、 \mathbf{x}_k は精度が良い順に並んでいる方が精度悪化が少なくてすむ。残差ノルムを指標として \mathbf{x}_k のソーティングを行う。また、固有ベクトルどうしが平行に近いとき実際には数値誤差が含まれるため同じベクトルに収束するときがまれにある。これを除外するために固有ベクトルどうしの角度のチェックを行う。同じベクトルに収束したときは失敗とみなし、再度別の法線ベクトルで再計算する。計算回数を試行 t と呼ぶことにする。

Algorithm 3. Successive Rayleigh quotient iteration of plane type.

```
[X, D] = function SPRQI(A)
θsame = 0.1°; ε = 10-12; tmax = 100n
Randomly choose z; k := 0;
for t = 0, 1, 2, ..., tmax
    [x, λ, E] = PRQI(A, z)
```

```

 $[\theta, j] = \min_{1 \leq j \leq k} \frac{180}{\pi} \cos^{-1} \frac{|(\mathbf{x}_j, \mathbf{x})|}{\|\mathbf{x}_j\| \|\mathbf{x}\|}$ 
if  $\theta \geq \theta_{\text{same}}$ 
     $k := k + 1; \mathbf{x}_k := \mathbf{x}; \lambda_k := \lambda; E_k := E$ 
else if  $\theta < \theta_{\text{same}}$  and  $E_j > E$ 
     $\mathbf{x}_j := \mathbf{x}; \lambda_j := \lambda; E_j := E$ 
end
 $k' = \#\{i \mid E_i < \epsilon\}$ 
if  $k' \geq n$  break
Sort  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$  to  $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k\}$  by  $\{E_1, \dots, E_k\}$  in ascending order.
Orthonormalize  $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{k'}\}$  by Gram-Schmidt.
Randomly choose  $\mathbf{z} \in W_k^\perp, W_k = \langle \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{k'} \rangle_{\mathbb{C}}$ .
end
 $X = (\mathbf{x}_1 \cdots \mathbf{x}_n); D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ 

```

5 数値実験

本節では Algorithm 3 の数値実験結果を示す。実験環境としては Linux 2.4.31, GNU C Compiler 3.3.5, CLAPACK 3.0 (dgesv, zgesv, BLAS) を用いる。精度の指標として 残差ノルムの最大値

$$E_{\max} = \max_k \|\mathbf{A}\mathbf{x}_k - \lambda_k \mathbf{x}_k\|_{\infty} \quad (18)$$

を用いる。まず、テスト行列として m 個の糊付け 21×21 型 Wilkinson 行列 [5]

$$W = \begin{pmatrix} 10 & 1 & & & & \\ 1 & 9 & 1 & & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & 0 & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & & 1 & 10 \end{pmatrix}, \quad W_m = \begin{pmatrix} W & \delta & & & \\ \delta & W & \delta & & \\ & \delta & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & W & \delta \\ & & & \delta & W \end{pmatrix}, \quad \delta = 10^{-4} \quad (19)$$

を用いる。(19) は固有値が近接する対称行列である。結果を図 2(a)–(d) に示す。図 2(a) より E_{\max} は $O(10^{-14})$ 程度であり十分の精度が得られている。図 2(b) より試行回数は $t = n$ であり固有対の計算は一度も失敗していない。図 2(c) よりニュートン反復の平均回数はサイズが上がるにつれて増大している。

次に Hilbert 行列

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/n \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & \cdots & \vdots \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/n & \cdots & \cdots & \cdots & 1/(2n) \end{pmatrix} \quad (20)$$

を用いる。(20)は条件数が大きい対称行列である。結果を図2(e)–(h)に示す。図2(e)より E_{\max} は $O(10^{-14})$ 程度であり十分の精度が得られている。図2(f)より試行回数は $t = n$ であり固有対の計算は一度も失敗していない。図2(g)よりニュートン反復の平均回数はサイズが上がるにつれて減少している。

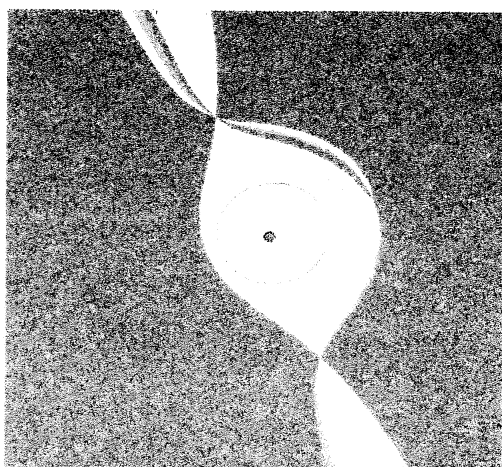
最後に Toeplitz 行列

$$T = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & \\ 0 & 2 & 1 & & & \\ \gamma & 0 & \ddots & \ddots & & \\ & \gamma & \ddots & \ddots & 1 & \\ & & \ddots & 0 & 2 & 1 \\ & & & \gamma & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \gamma = 1.1, 1.5, 2.0 \quad (21)$$

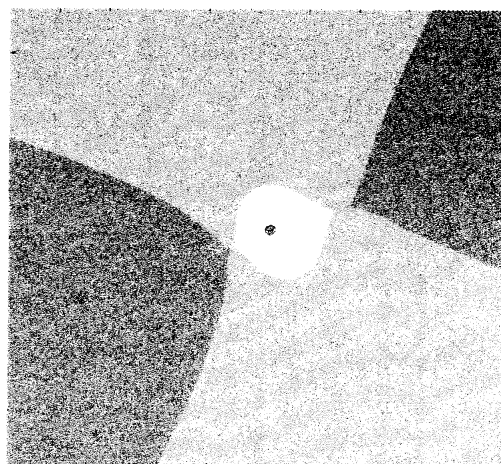
を用いる。これはサイズが大きくなるにつれて固有ベクトルどうしが平行に近づく非対称行列である。結果を図3(a)–(f)に示す。図3(a), (e)より固有ベクトルどうしの角度の最小値が 2° までは E_{\max} は $O(10^{-14})$ 程度であり十分の精度が得られている。 2° 未満になると精度悪化がみられる。図3(f)より角度が 2° までは試行回数は $t = n$ であるが、 2° 未満になると固有対の計算の失敗が増大する。

参考文献

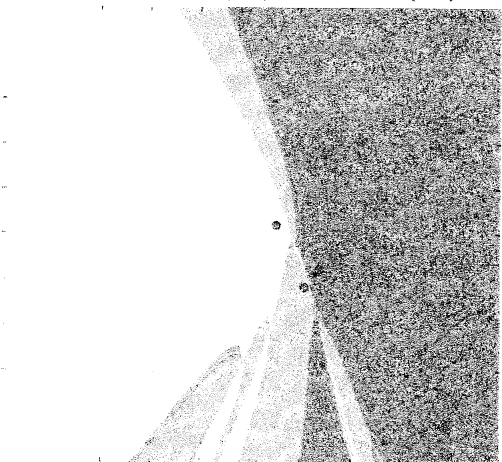
- [1] F. シャトラン 著, 行列の固有値 (新装版) 最新の解法と応用, 2003.
- [2] M. B. Elgindi and A. Kharab, The quadratic method for computing the eigenpairs of a matrix, Intern. J. Computer Math., **73** (2000), 571–530.
- [3] K. Kondo and Y. Nakamura, Determinantal solutions of solvable chaotic systems, J. Comp. Appl. Math., **145** (2002), 361–372.
- [4] 西沢 清子, 関口 晃司, 吉野 邦生, フラクタルと数の世界, 海分堂出版, 1991.
- [5] J. Rutter, A serial implementation of Cuppen's divide and conquer algorithm for the symmetric eigenvalue problem, Computer Science Division Report No. UCB//CSD-94-799, University of California.



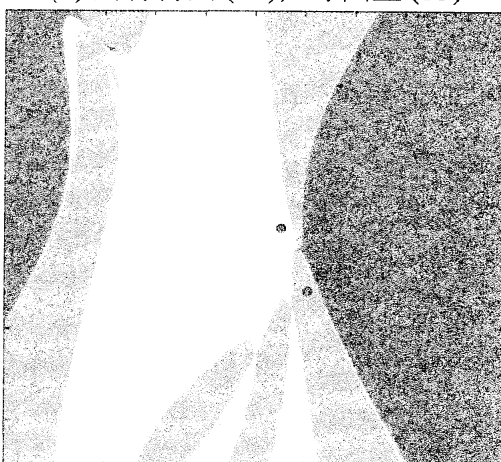
(a) 対称行列 (16), 平面型 (14)



(b) 対称行列 (16), 球面型 (15)



(c) 非対称行列 (17), 平面型 (14)



(d) 非対称行列 (17), 球面型 (15)

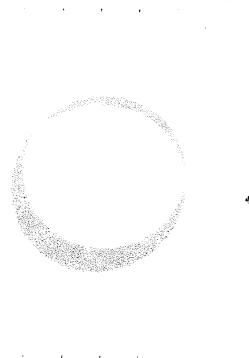
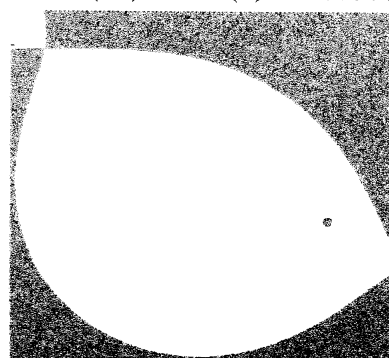
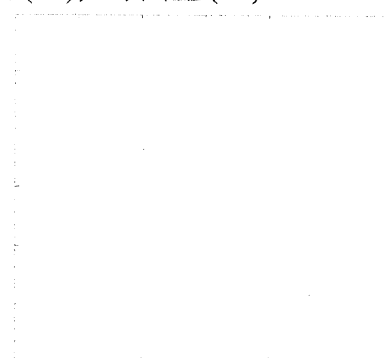
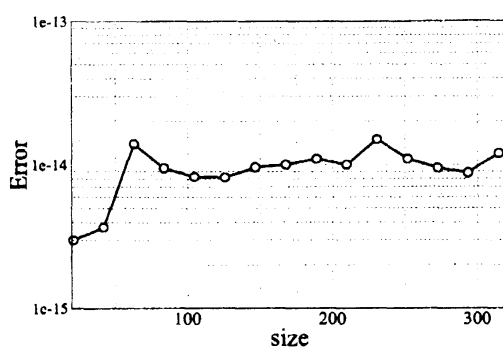
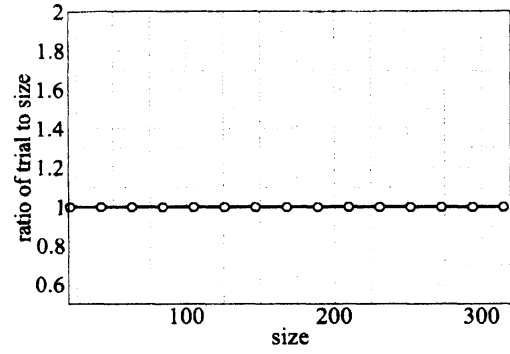
(e) 非対称行列 (17),
平面型 (14), $z \perp x_3$ (f) 非対称行列 (17),
平面型 (14), $z \perp x_2$ (g) 非対称行列 (17),
平面型 (14), $z \perp \langle x_2, x_3 \rangle_{\mathbb{R}}$

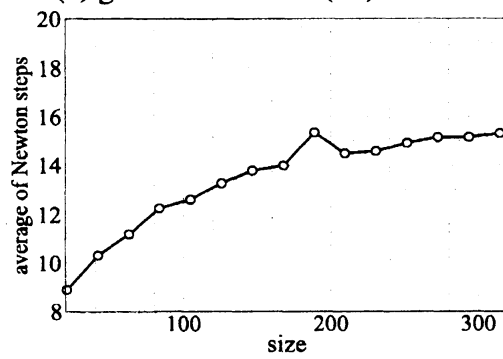
図 1: ニュートン法の収束領域.



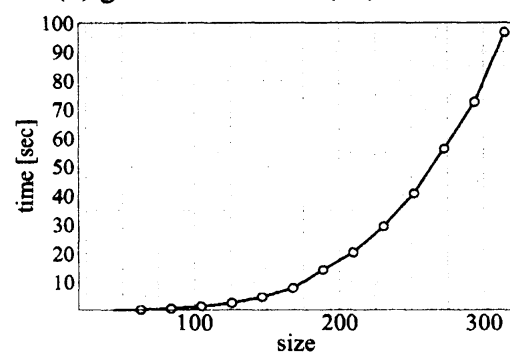
(a) glued-Wilkinson (19): Error



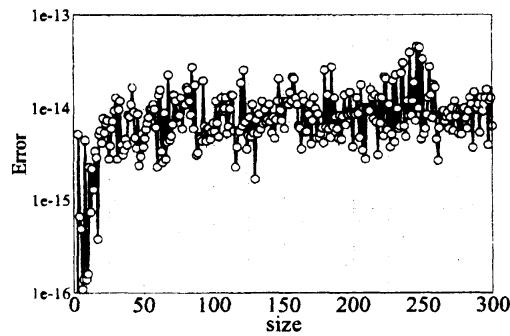
(b) glued-Wilkinson (19): Trials



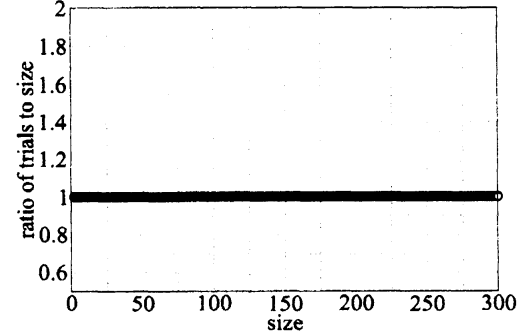
(c) glued-Wilkinson (19): Newton steps



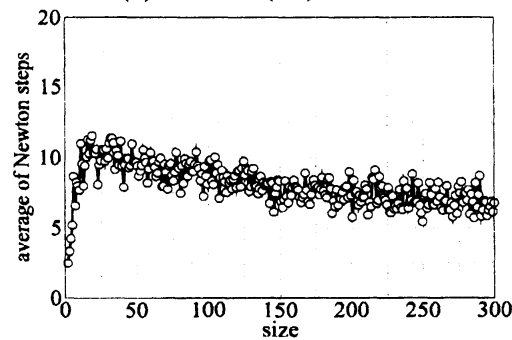
(d) glued-Wilkinson (19): Time



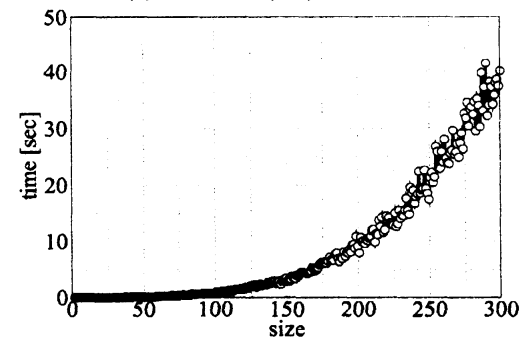
(e) Hilbert (20): Error



(f) Hilbert (20): Trials

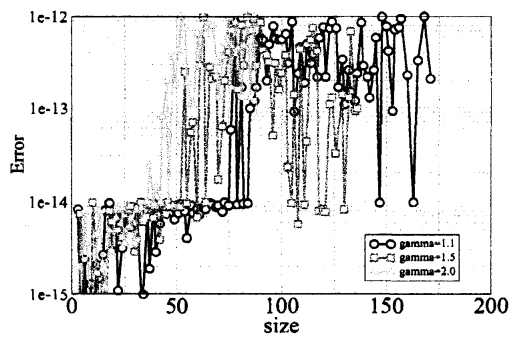


(g) Hilbert (20): Newton steps

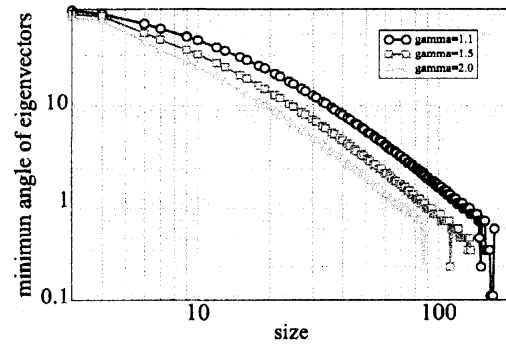


(h) Hilbert (20): Time

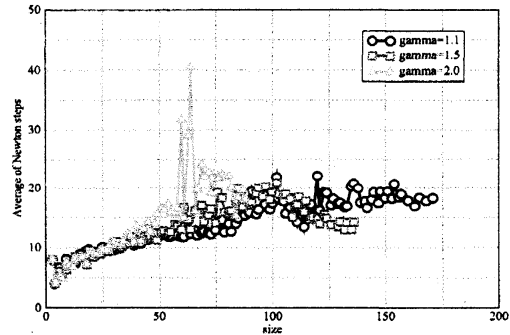
図 2: 実験結果その 1



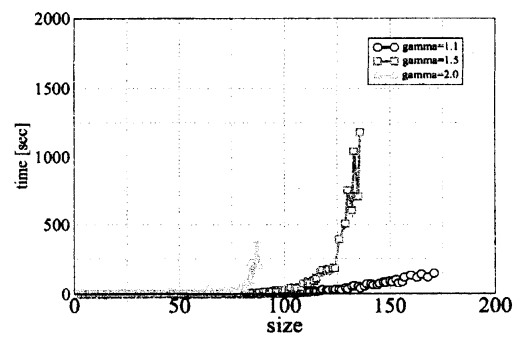
(a) Toeplitz (21): Error



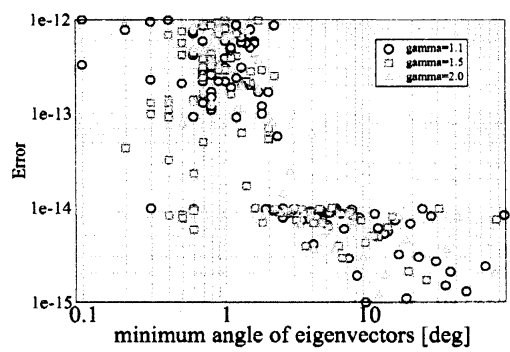
(b) Toeplitz (21): Minimum angle



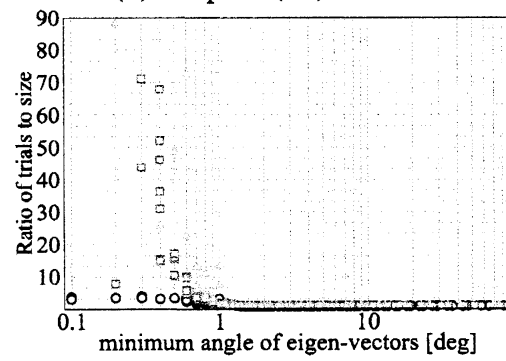
(c) Toeplitz (21): Newton steps



(d) Toeplitz (21): Time



(e) Toeplitz (21): Error



(f) Toeplitz (21): Trials

図 3: 実験結果その 2